

# 特許協力条約

PCT

特許性に関する国際予備報告（特許協力条約第二章）

(法第 12 条、法施行規則第 56 条)

[PCT36 条及び PCT 規則 70]

出願人又は代理人 の書類記号 PINA-17024	今後の手続きについては、様式PCT/ I P E A / 4 1 6を参照すること。	
国際出願番号 PCT/ J P 2 0 0 5 / 0 0 3 5 5 8	国際出願日 (日. 月. 年) 2 4 . 0 2 . 2 0 0 5	優先日 (日. 月. 年) 2 4 . 0 2 . 2 0 0 4
国際特許分類 ( I P C ) Int.Cl. G06F19/00(2006. 01), G01N33/48(2006. 01), G01N33/566(2006. 01), G01N33/68(2006. 01)		
出願人 (氏名又は名称) 株式会社インシリコサイエンス		

1. この報告書は、PCT35条に基づきこの国際予備審査機関で作成された国際予備審査報告である。  
法施行規則第57条（PCT36条）の規定に従い送付する。

2. この国際予備審査報告は、この表紙を含めて全部で 3 ページからなる。

3. この報告には次の附属物件も添付されている。

a. ☐ 附属書類は全部で \_\_\_\_\_ ページである。

☐ 補正されて、この報告の基礎とされた及び／又はこの国際予備審査機関が認めた訂正を含む明細書、請求の範囲及び／又は図面の用紙（PCT規則70.16及び実施細則第607号参照）

☐ 第I欄4.及び補充欄に示したように、出願時における国際出願の開示の範囲を超えた補正を含むものとこの国際予備審査機関が認定した差替え用紙

b. ☐ 電子媒体は全部で \_\_\_\_\_ （電子媒体の種類、数を示す）。  
配列表に関する補充欄に示すように、電子形式による配列表又は配列表に関連するテーブルを含む。  
（実施細則第802号参照）

4. この国際予備審査報告は、次の内容を含む。

☒ 第I欄 国際予備審査報告の基礎

☐ 第II欄 優先権

☐ 第III欄 新規性、進歩性又は産業上の利用可能性についての国際予備審査報告の不作成

☐ 第IV欄 発明の単一性の欠如

☒ 第V欄 PCT35条(2)に規定する新規性、進歩性又は産業上の利用可能性についての見解、それを裏付けるための文献及び説明

☐ 第VI欄 ある種の引用文献

☐ 第VII欄 国際出願の不備

☐ 第VIII欄 国際出願に対する意見

国際予備審査の請求書を受理した日 26. 09. 2005	国際予備審査報告を作成した日 12. 01. 2006	
名称及びあて先 日本国特許庁 (I P E A / J P) 郵便番号 100-8915 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	特許庁審査官 (権限のある職員) 宮久保 博幸	5 L 3136
	電話番号 03-3581-1101 内線 3562	

様式PCT/ IPEA/ 409 (表紙) (2005年4月)

## 第 I 欄 報告の基礎

1. 言語に関し、この予備審査報告は以下のものを基礎とした。

- ☒ 出願時の言語による国際出願
- ☐ 出願時の言語から次の目的のための言語である \_\_\_\_\_ 語に翻訳された、この国際出願の翻訳文
- ☐ 国際調査 (PCT規則12.3(a)及び23.1(b))
- ☐ 国際公開 (PCT規則12.4(a))
- ☐ 国際予備審査 (PCT規則55.2(a)又は55.3(a))

2. この報告は下記の出願書類を基礎とした。(法第6条(PCT14条)の規定に基づく命令に回答するために提出された差替え用紙は、この報告において「出願時」とし、この報告に添付していない。)

☒ 出願時の国際出願書類

☐ 明細書

第 \_\_\_\_\_ ページ、出願時に提出されたもの

第 \_\_\_\_\_ ページ\*、 \_\_\_\_\_ 付かで国際予備審査機関が受理したもの

第 \_\_\_\_\_ ページ\*、 \_\_\_\_\_ 付かで国際予備審査機関が受理したもの

☐ 請求の範囲

第 \_\_\_\_\_ 項、出願時に提出されたもの

第 \_\_\_\_\_ 項\*、PCT19条の規定に基づき補正されたもの

第 \_\_\_\_\_ 項\*、 \_\_\_\_\_ 付かで国際予備審査機関が受理したもの

第 \_\_\_\_\_ 項\*、 \_\_\_\_\_ 付かで国際予備審査機関が受理したもの

☐ 図面

第 \_\_\_\_\_ ページ/図、出願時に提出されたもの

第 \_\_\_\_\_ ページ/図\*、 \_\_\_\_\_ 付かで国際予備審査機関が受理したもの

第 \_\_\_\_\_ ページ/図\*、 \_\_\_\_\_ 付かで国際予備審査機関が受理したもの

☐ 配列表又は関連するテーブル

配列表に関する補充欄を参照すること。

3. ☐ 補正により、下記の書類が削除された。

- ☐ 明細書 第 \_\_\_\_\_ ページ
- ☐ 請求の範囲 第 \_\_\_\_\_ 項
- ☐ 図面 第 \_\_\_\_\_ ページ/図
- ☐ 配列表 (具体的に記載すること) \_\_\_\_\_
- ☐ 配列表に関連するテーブル (具体的に記載すること) \_\_\_\_\_

4. ☐ この報告は、補充欄に示したように、この報告に添付されかつ以下に示した補正が出願時における開示の範囲を超えてされたものと認められるので、その補正がされなかったものとして作成した。(PCT規則70.2(c))

- ☐ 明細書 第 \_\_\_\_\_ ページ
- ☐ 請求の範囲 第 \_\_\_\_\_ 項
- ☐ 図面 第 \_\_\_\_\_ ページ/図
- ☐ 配列表 (具体的に記載すること) \_\_\_\_\_
- ☐ 配列表に関連するテーブル (具体的に記載すること) \_\_\_\_\_

\* 4. に該当する場合、その用紙に“superseded”と記入されることがある。

第V欄 新規性、進歩性又は産業上の利用可能性についての法第12条(PCT35条(2))に定める見解、それを裏付ける文献及び説明

## 1. 見解

新規性(N)	請求の範囲	1-31	有
	請求の範囲		無
進歩性(IS)	請求の範囲	6-7, 16-17, 26-27	有
	請求の範囲	1-5, 8-15, 18-25, 28-31	無
産業上の利用可能性(IA)	請求の範囲	1-31	有
	請求の範囲		無

## 2. 文献及び説明(PCT規則70.7)

[国際調査報告で引用された文献]

文献1: WO 2002/057954 A1 (株式会社インシリコサイエンス) 2002.07.25, 全文, 第1-16図

文献2: WO 1996/013785 A1 (板井昭子) 1996.05.09, 全文, 第1-4図

請求の範囲1-5, 8-15, 18-25, 28-31に係る発明は、国際調査報告で引用された文献1-2により進歩性を有しない。

文献1には、タンパク質の原子座標を基準振動解析により変位させることにより、誘導適合を含めた立体構造を複数生成し、これらの複数の立体構造のうち1つの立体構造を選択し、リガンドとのドッキング操作を行うことが記載されている。

文献2には、タンパク質中の水素結合性官能基に対してダミー原子を設定し、ダミー原子の原子間距離とリガンドの水素結合性ヘテロ原子の原子間距離との差を用いてリガンドの配座を決定し、リガンドの構造を変化させて複合体構造を最適化し、有望なリガンドを選択することが記載されている。

請求の範囲1に係る発明が「誘導適合を反映した誘導適合パラメータを用いて動的挙動を考慮した構造変化を行う」構成を有するのに対し、文献1には「基準振動解析により誘導適合を含めた立体構造を生成する」ことが記載されている。両者は、いずれも誘導適合を反映した構造変化を行うものである点で同様の構成を有しており、請求の範囲1に係る発明において、引用文献1記載の発明に比較して、格別の情報処理手順が明確に特定されているとは認められない。請求の範囲1における「空間点を指定する」構成、および「相互作用関数を計算する」構成は、文献2の上記記載から当業者が容易に想到し得たものである。

請求の範囲2-5, 8-15, 18-25, 28-31についても同様である。

請求の範囲6-7, 16-17, 26-27に係る発明は、国際調査報告で引用された各文献に対して進歩性を有する。

タンパク質座標データに対し基準振動計算を行い、各アミノ酸のゆらぎの大きさを求め、当該ゆらぎの大きさを拘束条件として、分子動力学計算を行うことは、上記文献のいずれにも記載も示唆もされていない。